# NECP-Atlas 中协方差数据制作模块的开发与验证

黄义涵 祖铁军* 曹良志 吴宏春

（西安交通大学 核科学与技术学院 西安　710049）

**摘要**　不确定度量化已经成为反应堆物理分析的普遍需求，核数据的协方差数据是开展不确定度量化的基础数据。在核数据处理程序 NECP-Atlas 中开发了协方差数据产生模块 covar_calc，产生适用于蒙特卡罗程序的连续能量协方差数据库与确定论程序的多群协方差数据库。covar_calc 可根据不同核数据在评价核数据库中的存储格式及不同的计算方法，分别处理评价核数据库给出的所有协方差数据，包括：平均裂变中子数、截面、次级粒子角度分布、裂变谱、共振参数、中子活化截面等数据的协方差数据。通过与核数据处理程序 NJOY21 中协方差数据制作模块的对比验证，表明 NECP-Atlas 制作的多群协方差数据库的精度与 NJOY21 相当,最大偏差小于 0.1%。在此基础上使用蒙特卡罗计算程序 NECP-MCX 和不确定度量化程序 NECP-UNICORN 分别计算得到不同基准题的灵敏度系数，并分别结合连续能量协方差数据库和多群协方差数据库，利用“三明治公式”计算得到最终的不确定度。结果表明，基于 NECP-Atlas 制作的多群协方差数据库计算得到的不确定度具有与 NJOY21 相当的精度。连续能量协方差和多群协方差制作精确，满足蒙特卡罗程序和确定论程序使用需求。

**关键词**　协方差数据；不确定度量化；评价核数据；核数据处理；协方差计算

**中图分类号**　TL32

# Development and Verification of Covariance Data Generation Module in NECP-Atlas

HUANG Yihan　ZU Tiejun　CAO Liangzhi　WU Hongchun

(*School of Nuclear Science and Technology*, *Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

**Abstract [Background]**: The quantification of uncertainty has become a common requirement in reactor physics analysis, with the covariance data of nuclear data serving as the foundational data for conducting uncertainty quantification. **[Purpose]**: This study aims to develop a covariance data generation module, covar_calc, in the nuclear data processing software NECP-Atlas to produce continuous energy covariance data for Monte Carlo programs and multi-group covariance data for deterministic programs. **[Methods]**: Covar_calc module was developed to process all covariance data provided in evaluated nuclear databases, according to the different storage formats of nuclear data and different computational methods. This included the covariance data of various parameters such as average fission

基金资助：国家重点研发计划（2022YFB1902600），国家自然科学基金（12075183）

第一作者：黄义涵，男，1997 年出生，2019 年毕业于西安交通大学，现为博士研究生，研究领域：核数据处理及核反应堆不确定度量化，E-mail：huangyihan9@stu.xjtu.edu.cn

通信作者：祖铁军，E-mail:tiejun@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期：2023-00-00，修回日期：2023-00-00

Supported by National Key Research and Development Program of China(2022YFB1902600), the National Natural Science Foundation of China(12075183).

First author: HUANG Yihan, male, born in 1997, graduated from Xi'an Jiaotong University in 2019, doctor student, focusing on nuclear data processing and reactor uncertainty quantification, E-mail:huangyihan9@stu.xjtu.edu.cn

Corresponding author: ZU Tiejun, E-mail:tiejun@mail.xjtu.edu.cn

neutron multiplicities, cross sections, angular distributions of secondary particles, fission spectrum, resonance parameters, and neutron activation cross-sections. **[Results]**: A comparative verification is carried out with the covariance data production module in the nuclear data processing software NJOY21 to demonstrate the accuracy of the multi-group covariance databases produced by NECP-Atlas and the maximum bias is less than 0.1%. Utilizing Monte Carlo calculation code NECP-MCX and uncertainty analysis code NECP-UNICORN, sensitivity coefficients for different benchmarks are calculated. By incorporating both continuous energy covariance databases and multi-group covariance data, and utilizing the "Sandwich formula," the final uncertainties are computed. The results indicate that the uncertainties calculated using the multi-group covariance data generated by NECP-Atlas exhibit comparable accuracy to those obtained with NJOY21. **[Conclusions]**: The precision in creating both continuous energy covariance and multi-group covariance meets the requirements for usage in Monte Carlo programs and deterministic programs, validating the efficacy of covar_calc module within NECP-Atlas for uncertainty quantification in reactor physics analysis.

**Key words** Covariance data, Uncertainty quantization, Evaluated nuclear data, Nuclear data process, Covariance calculation

随着高保真核反应堆物理计算方法的发展，由于理论模型等因素带来的不确定性越来越小。核数据作为核反应堆物理计算最基础的输入参数，其理论计算、实验测量、数据评价等过程，不可避免的产生一定的不确定度[1]，其不确定度已经成为核反应堆物理计算结果不确定度的重要来源，因此，进行核反应堆高精度模拟给出最佳估计值并量化核数据造成的计算结果的不确定度已成为核反应堆设计的普遍需求。

核数据的不确定性以协方差的形式保存在评价和数据库中。目前，评价核数据库给出了平均裂变中子数、共振参数、中子反应截面、次级粒子角度分布、裂变谱、活化截面等数据的协方差[2]。随着核数据不确定度量化需求的不断增加，评价核数据库中提供的协方差数据也在大幅增加。美国的 ENDF/B 系列评价核数据库，从 ENDF/B-VII.0[3]，ENDF/B-VII.1[4]到 ENDF-B/VIII.0[5]，提供协方差数据的核素数量以及协方差数据的类型均有了明显的增加，目前最新的 ENDF/B-VIII.0 评价核数据库提供了 182 个核素的评价协方差数据库；中国核数据中心最新发布的 CENDL-3.2 中，提供了 77 个核素的中子截面协方差数据[6]。

评价核数据库提供的协方差数据（下文称为评价协方差数据）具有类型多样、反应道众多、协方差网格不统一、相互关系复杂等特点，不能直接应用于核反应堆物理计算的不确定度量化，因此需要先对评价核数据库中的协方差数据进行处理，制作为特定格式协方差数据库。目前国际上能够基于对评价协方差数据进行处理的程序较少。国际上广泛使用的核数据处理程序 NJOY 在 2007 年接入了日本原子能机构开发的 ERRORJ 程序[7]，形成了协方差数据产生模块 ERRORR，可计算多群协方差，但其对次级粒子角度分布的处理仅限于弹性散射反应道的一阶勒让德系数[8]。国内的核数据处理程序如中国核数中心开发的 RULER 程序[9]、清华大学开发的 RXSP 程序[10]等不具备处理评价协方差数据的功能。从实现我国核电软件自主化的角度而言，研发自主化的协方差数据计算模块的功能是十分必要的。另一方面，使用蒙特卡罗程序计算连续能量灵敏度系数的理论与功能已经得到了逐步开发并完善[11,12]，蒙特卡罗程序因为几何适应性强，计算精度高的优点，在复杂几何的条件下计算得到的复杂响应的灵敏度系数与传统确定论方法的计算结果有不同程度上的区别[13]。目前，国际上核数据处理程序缺乏产生适用于蒙特卡罗程序的连续能量协方差数据的产生功能，因此有必要开发产生连续能量协方差的功能，满足基于蒙特卡罗计算程序的不确定度量化需求。

本文在西安交通大学核工程计算物理(Nuclear Engineering Computational Physics, NECP）实验室自主研发的核数据处理程序 NECP-Atlas 的基础上[14]，开发了应用协方差数据产生模块，实现了利用评价协方差数据计算生成连续能量格式协方差数据和多群格式协方差数据（以下将两者统称为应用协方差数据）的功能，并对该模块进行了验证。

## 1　应用协方差数据计算方法

目前，ENDF-6 格式评价核数据库中给出了平均裂变中子数、共振参数、中子截面、出射粒子角度分布、出射粒子能量分布、中子活化截面的协方差数据[2]。以下分别介绍其对应的应用协方差数据计算方法。

### 1.1　平均裂变中子数、中子反应截面、中子活化截面应用协方差的计算

平均裂变中子数、中子反应截面、中子活化截面的评价协方差数据的存储格式类似，其处理方法一致，本文以中子反应截面为例，对这三类核数据的应用协方差产生过程进行介绍。

评价协方差数据有两种格式，分别为 NI 格式(NI-type)和 NC 格式(NC-type)。NI 格式为显式格式，评价核数据库中直接给出当前反应道与其他反应道之间的协方差数据；NC 格式为隐式格式，评价核数据库未直接给出协方差数据，当前反应道的协方差根据分反应道的协方差数据通过数学关系推导得到。

评价协方差数据通常分为若干能量段进行存储，各能量段协方差数据不同，并且不同反应道的协方差能量网格也不一定相同[2]。为便于后续的协方差数据的加和以及归并计算，需要将评价核数据库中的所有反应道的能量网格进行合并，构建统一的联合能量网格。此外，评价协方差数据的能量网格和用户最后需要输出的多群能群结构边界点通常也是不一致的，因此还需要将用户输入的多群能群结构的边界点并入联合能量网格。联合能量网格的构建过程如图 1 所示。

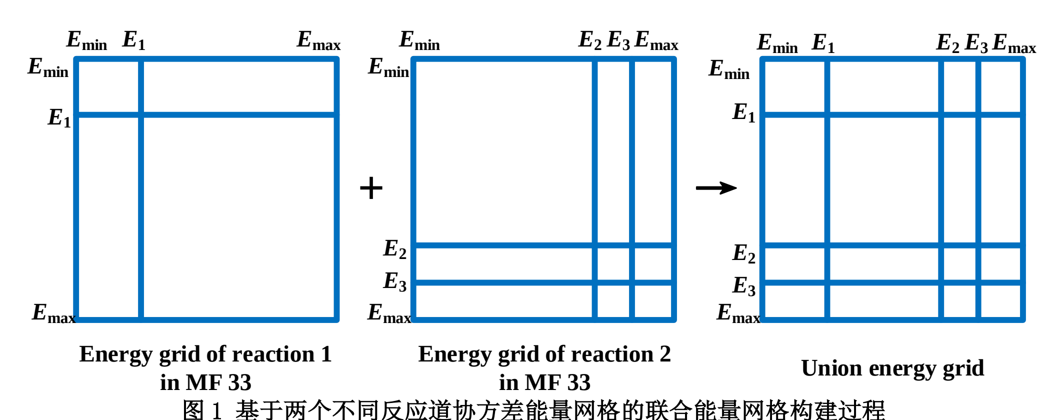



图 1　基于两个不同反应道协方差能量网格的联合能量网格构建过程

Fig. 1 Construction process of union energy grid based on the grids of two different reactions

联合能量网格上的通量和截面通过下式计算：

$$\phi_I = \int_I \phi(E) dE \tag{1}$$

$$x_I = \frac{\int_I \phi(E) x(E) dE}{\int_I \phi(E) dE} = \frac{\int_I \phi(E) x(E) dE}{\phi_I} \tag{2}$$

式中：$I$ 为联合能量网格序号；$\phi_I$ 为第 $I$ 网格的通量；$x_I$ 为第 $I$ 网格的截面；$\phi(E)$ 为能量点 $E$ 处的通量；$x(E)$ 为能量点 $E$ 处的截面值，由 NECP-Atlas 经共振重构、多普勒展宽等计算等模块产生[15, 16]。其中 $\phi(E)$ 可以由用户选择，也可以使用 NECP-Atlas 计算得到的通量。将式(2)离散化，并进行变量替换，定义 $\frac{\phi_i}{\phi_I} = \alpha_{Ii}$，得到：

$$x_I = \frac{\sum_{i\in I} \phi_i x_i}{\phi_I} = \sum_{i\in I} \alpha_{Ii} x_i \tag{3}$$

另一反应道截面 $y$ 联合能量网格上 $J$ 上的截面 $y_J$ 可以用类似的公式计算。

由于 NC 格式协方差数据是由 NI 格式协方差数据线性组合得到，因此需要首先在联合网格上计算 NI 格式的协方差数据。对于某反应道在某能量点处的截面 $x$ 和另一反应道在另一能量点处的截面 $y$，评价核数据库中可能给出多个独立的 NI 格式协方差数据，因此两个反应截面总的协方差可以由各 NI 格式协方差加

和获得：

$$\mathrm{cov}\left(x,y\right)=\sum_{n=1}^{nim}\mathrm{cov}\left(x,y\right)_n \tag{4}$$

式中：*nim* 为当前两反应道评价协方差中包含的 NI 格式的个数。$\mathrm{cov}\left(x,y\right)_n$ 为第 *n* 个 NI 格式协方差数据，根据式(3)和式(4)以及协方差数据的传递性质[17]，在联合能量网格上，某反应道第 *I* 个网格下的截面 $x_I$ 与另一反应道第 *J* 个网格下的截面 $y_J$ 的协方差可以写为：

$$\mathrm{cov}\left(x_I,y_J\right)=\sum_{n=1}^{nim}\mathrm{cov}\left(x_I,y_J\right)_n=\sum_{n=1}^{nim}\sum_{\substack{i\in I\\ j\in J}}\alpha_{Ii}\alpha_{Jj}\,\mathrm{cov}\left(x_{Ii},y_{Jj}\right)_n \tag{5}$$

式中：$x_{Ii},y_{Jj}$ 分别为某反应道第 *I* 网格内第 *i* 个能量点处的截面值，以及另一反应道第 *J* 网格内第 *j* 个能量点处的截面值。$\mathrm{cov}\left(x_{Ii},y_{Jj}\right)_n$ 为截面 $x_{Ii}$ 和截面 $y_{Jj}$，在第 *n* 个 NI 格式中的协方差。

在联合能量网格上，$x_I$ 和 $y_J$ 的相对协方差计算公式为：

$$\mathrm{rcov}\left(x_I,y_J\right)=\frac{\mathrm{cov}\left(x_I,y_J\right)}{x_I y_J}=\frac{\sum_{n=1}^{nim}\mathrm{cov}\left(x_I,y_J\right)_n}{x_I y_J} \tag{6}$$

在上述联合网格下的协方差数据的计算过程中，若在式(1)中选择中子通量选择常数谱，此时计算得到的协方差数据与问题无关，获得的协方差数据库即为连续能量协方差数据。由于联合能量网格内所有能量点的协方差相同，因此连续能量协方差数据库中对某一能量网格仅给出一个协方差数据。当蒙特卡罗程序需要使用某一能量点的协方差数据时，直接使用该能量点所在网格的协方差数据。

若需要得到特定能群结构的多群协方差数据，还需要将联合能量网格上的协方差数据按多群能群结构进行归并。群通量和多群截面计算公式为：

$$\phi_K=\sum_{I\in K}\phi_I \tag{7}$$

$$X_K=\frac{\sum_{I\in K}\phi_I x_I}{\phi_K} \tag{8}$$

式中：$\phi_K$ 为多群结构中上第 *K* 群的通量；$\phi_I$ 为联合网格上第 *I* 个网格的通量；$X_K$ 为多群结构中某反应道 *X* 第 *K* 群的多群截面值。同样，另一反应道 *Y* 的第 *L* 群多群截面可以写为：

$$Y_L=\frac{\sum_{J\in L}\phi_J Y_J}{\phi_L} \tag{9}$$

根据协方差的可加性，$X_K$ 和 $Y_L$ 之间的多群协方差可以由联合网格上的协方差归并得到：

$$\mathrm{cov}\left(X_K,Y_L\right)=\frac{\sum_{I\in K,J\in L}\phi_I\phi_J\,\mathrm{cov}\left(x_I,y_J\right)}{\phi_K\phi_L} \tag{10}$$

将以上绝对协方差除以多群截面值后得到相对协方差：

$$\mathrm{rcov}\left(X_K,Y_L\right)=\frac{\sum_{I\in K,J\in L}\phi_I\phi_J\,\mathrm{cov}\left(x_I,y_J\right)}{\phi_K\phi_L X_K Y_L} \tag{11}$$

对于 NC 格式协方差，评价核数据库中给出了目标反应道与其他反应道之间的线性关系，例如，某反应道第 *I* 网格和另一反应道第 *J* 网格上的截面值 $x_I$ 和 $y_J$，可以由其他反应道通过如下线性加和获得：

$$x_I = \sum_a C(a) A_I(a) \tag{12}$$

$$y_J = \sum_b C(b) B_J(b) \tag{13}$$

式中：$C(a)$为目标反应道和某一反应道 $a$ 之间的线性系数；$A_I(a)$为反应道 $a$ 在联合能量网格上第 $I$ 网格的截面值；$C(b)$与$B_J(b)$的意义与$C(a)$和$A_I(a)$类似。将式(12)和(13)代入式(11)，利用协方差数据的传递关系，得到多群结构上 NC 格式相对协方差数据：

$$\mathrm{cov}(X_K, Y_L) = \frac{\sum_{a,b} \sum_{\substack{I\in K \\ J\in L}} C_I(a) C_J(b) \phi_I \phi_J \mathrm{cov}\left[A_I(a), B_J(b)\right]}{\phi_K \phi_L X_K Y_L} \tag{14}$$

最终，在输出的多群能群结构中，多群协方差为 NI 格式中与 NC 格式中计算得到的协方差之和。多群平均裂变中子数、多群活化截面的协方差数据同理计算得到。

### 1.2 次级粒子角度分布协方差数据计算

通过处理次级粒子角度分布的协方差数据，计算得到多群勒让德系数的协方差数据和平均散射角余弦的协方差数据。多群勒让德系数的协方差数据与中子截面的处理流程相似，同样需要先在联合网格下计算协方差，再以核反应率为权重，将协方差归并至输出的多群能群结构上，本节不再赘述。以下推导多群平均散射角余弦协方差的计算公式：

实验室系下平均散射角余弦的计算公式可以写为：

$$\bar{\mu}_l = \int_{-1}^{1} \mu_l f(\mu_l) d\mu_l \tag{15}$$

式中：$\bar{\mu}_l$为实验室系下平均散射角余弦；$\mu_l$为实验室系下散射角余弦；$f(\mu_l)$为实验室系下散射角余弦的概率分布。

将$f(\mu_l)$用勒让德多项式展开：

$$f(\mu_l) = \sum_{n=0}^{NL} \frac{2n+1}{2} a_{l,n}(E) P_n(\mu_l) \tag{16}$$

式中：$NL$ 为勒让德多项式系数个数；$a_{l,n}(E)$ 为实验室系下勒让德多项式系数。将式(16)代入式(15)，同时利用勒让德多项式在[-1,1]上的正交性[18]，式(15)可以表示为：

$$\bar{\mu}_l = \int_{-1}^{1} P_1(\mu_l) \sum_{n=0}^{NL} \frac{2n+1}{2} a_{l,n}(E) P_n(\mu_l) d\mu_l = a_{l,1}(E) \tag{17}$$

上式表明，实验室系的平均散射角余弦与实验室系的一阶勒让德系数相等，因此其协方差也相等，同样地在联合网格下协方差也相等，即：

$$\mathrm{cov}\left(\bar{\mu}_{l,I}, \bar{\mu}_{l,J}\right) = \mathrm{cov}\left(a_{l,1,I}, a_{l,1,J}\right) \tag{18}$$

式中：$\bar{\mu}_{l,I}$、$\bar{\mu}_{l,J}$为实验室系下不同入射能群的平均散射角余弦；$a_{l,1,I}$、$a_{l,1,J}$为实验室系下不同入射能群的一阶勒让德系数。当评价核数据库中直接给出实验室系下的勒让德系数时，其协方差数据可以直接使用，当评价核数据库中给出质心系下的勒让德系数时，其协方差数据还需要进行相应的坐标变换，得到实验室系下的勒让德系数[19]，最终可以推导出实验室系下平均散射角余弦和质心系下的勒让德系数之间的关系为：

$$\bar{\mu}_l = \frac{2}{3R} a_{c,0} + \left(1 - \frac{3}{5R^2}\right) a_{c,1} + \cdots + \left(\left(\frac{n}{2n-1} - \frac{n+2}{2n+3}\left(\frac{1}{R}\right)^2\right)\left(-\frac{1}{R}\right)^{n-1}\right) a_{c,n} \tag{19}$$

式中：$a_{c,n}$ 为质心系下的第 $n$ 阶勒让德系数，$R$ 满足公式 $R = A\sqrt{1 - \frac{(A+1)(-Q)}{AE}}$，$A$ 为核素的相对中子质量，$Q$ 为质心系下的反应阈能，$E$ 为质心系下的入射中子能量。将式(19)中 $a_{c,n}$ 前的系数，例如 $\frac{2}{3R}$、$1-\frac{3}{5R^2}$ 等定义为 $U_n$，则在联合能量网格下，由质心系下勒让德系数计算实验室系下平均散射角余弦的协方差的公式为：

$$\mathrm{cov}\left(\bar{\mu}_{l,I}, \bar{\mu}_{l,J}\right) = \sum_{i,j=1}^{n} U_i U_j \,\mathrm{cov}\left(a_{c,i,I}, a_{c,j,J}\right) \tag{20}$$

式中：$a_{c,i,I}$、$a_{c,j,J}$ 分别为质心系下的第 $I$ 网格内第 $i$ 阶勒让德系数与第 $J$ 网格内第 $j$ 阶勒让德系数。

式(19)和(20)计算过程中需要用到联合网格下的勒让德系数，联合网格下的勒让德系数计算公式与式(2)类似：

$$a_I = \frac{\int_I \phi(E) a(E) dE}{\int_I \phi(E) dE} = \frac{\int_I \phi(E) a(E) dE}{\phi_I} \tag{21}$$

式中：$a_I$ 为第 $I$ 网格内的某一阶数下的勒让德系数。式(21)需要用由式(1)计算得到的中子通量。在中子通量计算时选择常数谱，此时计算得到的平均散射角余弦协方差数据与问题无关，输出的协方差数据库即为连续能量协方差数据，可直接用于蒙特卡罗程序的不确定度量化。

对于多群平均散射角余弦协方差的计算，以核反应率为权重，将归并至输出网格上，类似于式(11)，平均散射角余弦相对协方差计算公式如下：

$$\mathrm{rcov}\left(\bar{\mu}_{l,K}, \bar{\mu}_{l,L}\right) = \frac{\sum_{\substack{I \in K \\ J \in L}} \phi_I \phi_J \sigma_I \sigma_J \,\mathrm{cov}\left(\bar{\mu}_{l,I}, \bar{\mu}_{l,J}\right)}{\phi_K \phi_L \sigma_K \sigma_L \bar{\mu}_{l,K} \bar{\mu}_{l,L}} \tag{22}$$

式中：$\bar{\mu}_{l,K}$ $\bar{\mu}_{l,L}$——多群能群结构上第 $K$ 群和第 $L$ 群平均散射角余弦；$\sigma_K$、$\sigma_L$——多群能群结构上第 $K$ 群和第 $L$ 群对应反应道的中子截面；$\sigma_I$、$\sigma_J$——联合网格上的第 $I$ 个网格和第 $J$ 个网格对应反应道的中子截面。

### 1.3 裂变谱多群协方差数据计算

评价核数据库给出了裂变反应道出射粒子能量分布的协方差，即裂变谱的协方差数据。对于裂变谱协方差数据的计算，首先在联合网格上计算裂变谱的协方差数据，然后以中子通量为权重，将协方差数据归并至输出的能群结构上，与式(10)类似。当入射中子能量为 $E$ 时，裂变谱协方差数据的计算公式如下：

$$\mathrm{cov}\left(p(E \to E'_K), p(E \to E'_L)\right) = \frac{\sum_{\substack{I \in K \\ J \in L}} \phi_I \phi_J \mathrm{cov}\left(p(E \to E'_I), p(E \to E'_J)\right)}{\phi_K \phi_L} \tag{23}$$

式中：$p(E \to E'_K), p(E \to E'_L)$——入射能量为 $E$ 的中子，散射至输出能群结构第 $K$ 群和第 $L$ 群的概率；$p(E \to E'_I), p(E \to E'_L)$——入射能量为 $E$ 的中子，散射至联合网格上第 $I$ 个网格和第 $J$ 个网格的

概率。

在计算多群裂变谱的相对协方差数据之前，需要计算入射能量为 $E$ 时的多群裂变谱，计算公式如下：

$$\chi_g = \frac{\sum_{g'} \sigma_{f,g'\to g}\phi_{,g'}}{\sum_{g'}\phi_{g'}\sum_{g}\sigma_{f,g'\to g}},\quad g' \in (el, eh) \tag{24}$$

式中：$g'$、$g$—— 分别为入射能群和出射能群；$\chi_g$—— 第 $g$ 群多群裂变谱；$\sigma_{f,g'\to g}$—— 多群裂变矩阵；$el$、$eh$—— 入射能量的下限和上限。

与截面的相对协方差计算类似，在裂变谱多群协方差数据基础上除以多群裂变谱，得到裂变谱相对协方差的计算公式如下：

$$\mathrm{rcov}\left(p\left(E\to E_K'\right), p\left(E\to E_L'\right)\right) = \frac{\sum_{\substack{I\in K\\ J\in L}} \phi_I\phi_J \mathrm{cov}\left(p\left(E\to E_I'\right), p\left(E\to E_J'\right)\right)}{\phi_K\phi_L\chi_K\chi_L} \tag{25}$$

### 1.4 共振参数多群协方差数据计算

评价核数据库给出了共振参数之间的协方差数据，需要将其转化为共振反应截面之间的协方差数据，并与中子截面协方差数据加和获得共振能区截面的协方差，用于不确定度量化。与处理中子截面协方差数据过程不同，共振参数协方差数据处理时，直接将共振参数协方差转化为输出网格上共振反应道的多群截面的协方差。转化公式如下：

$$\mathrm{cov}(X_I, X_J) = \sum_i\sum_j\left(\frac{\partial X_I}{\partial \Gamma_i}\right)\left(\frac{\partial X_J}{\partial \Gamma_j}\right)\mathrm{cov}(\Gamma_i, \Gamma_j) \tag{26}$$

式中：$I$、$J$—— 不同的输出网格能群；$X_I$、$X_J$—— 不同能群的共振反应道的截面；$\Gamma_i$、$\Gamma_j$—— 不同的共振参数；评价核数据库中提供了不同共振参数之间的协方差 $\mathrm{cov}(\Gamma_i, \Gamma_j)$，对于灵敏度系数 $\partial X_I / \partial \Gamma_i$，采用直接扰动方法进行计算。

在可分辨共振能区，评价核数据库对于不同的共振公式，分别给出了共振峰能量、不同反应道共振峰宽度和散射半径的协方差数据。其中截面对共振峰能量和不同反应道共振峰宽度的灵敏度系数，直接扰动法计算公式如下：

$$\frac{\partial \sigma_g}{\partial \Gamma_i} = \frac{1}{\Delta g}\int_{E\in g}\frac{\partial \sigma(E)}{\partial \Gamma_i}dE = \frac{1}{\Delta g}\int_{E\in g}\frac{\sigma^+(E)-\sigma^-(E)}{2\Delta\Gamma_i}dE \tag{27}$$

式中：$\sigma^+(E)$，$\sigma^-(E)$—— 在能量 $E$ 处对第 $i$ 个共振参数扰动 $\Gamma_i + \Delta\Gamma_i$ 或 $\Gamma_i - \Delta\Gamma_i$ 后的点截面/b。不同共振公式扰动的共振参数不同，如对于 Single-Level Breit-Wigner 公式和 Multilevel Breit-Wigner 公式，分别扰动共振峰能量、弹性散射反应道宽度、俘获反应道宽度和裂变反应道宽度、散射半径；对于 Reich-Moore 公式，分别扰动共振峰能量、弹性散射反应道宽度、俘获反应道宽度、第一部分裂变反应道宽度和第二部分裂变反应道宽度、散射半径。其中，对共振峰能量扰动 0.01%，对其他核数据扰动 1%。

## 2 程序开发及应用协方差数据库直接数值验证

基于上述理论，在 NECP-Atlas 开发了协方差数据产生模块 covar_calc, 实现了基于评价协方差数据加工制作应用协方差数据的功能。以截面的应用协方差数据为例，其产生过程如图 2 所示。NECP-Atlas 首先读取评价核数据及用户输入；然后通过共振重构、多普勒展宽等模块，加工生成特定温度点下的点截面数

据库（PENDF）；根据评价协方差数据，构建联合能量网格，如果最终需要输出多群协方差数据库，同时将多群能群结构边界点并入联合能量网格；基于联合能量网格，计算各网格上的截面、通量、协方差数据；最终，对于连续能量协方差数据，直接输出计算结果，对于多群协方差数据，则需要将联合能量网格下的结果归并至多群能群结构上。

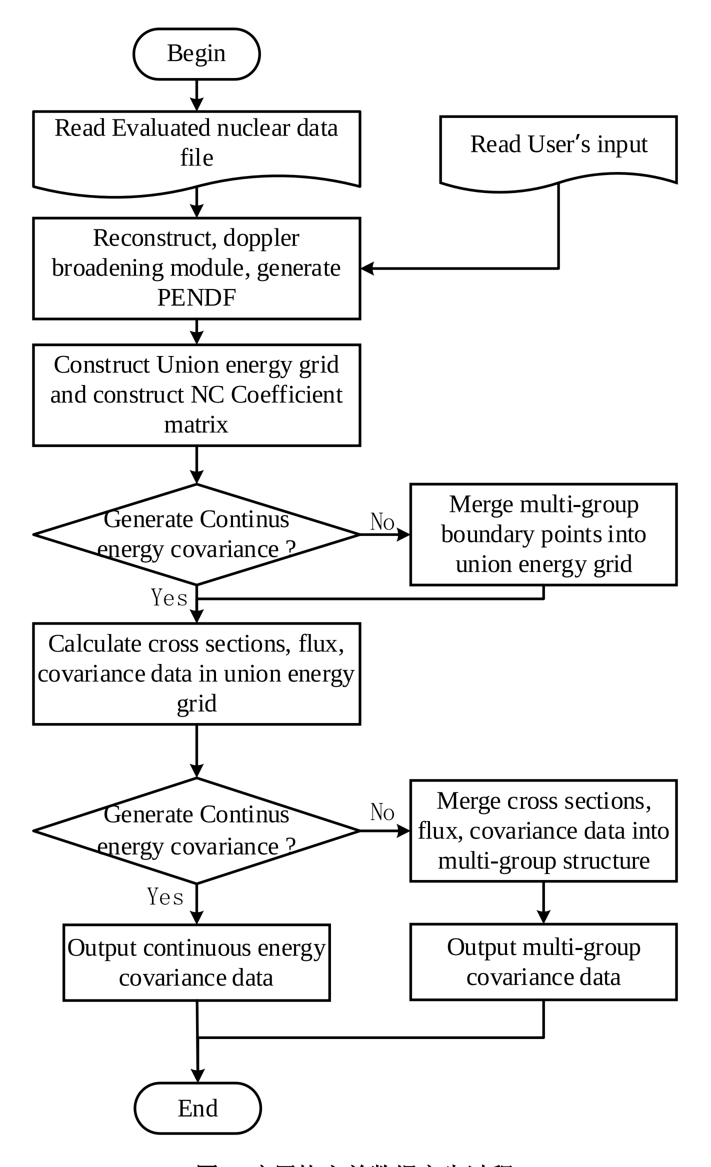



**图 2 应用协方差数据产生过程**

Fig.2 The process of applying covariance data generation

基于 covar_calc，利用 ENDF/B-VIII.0 评价核数据库，产生了相应的多群协方差数据库和连续能量协方差数据库。为验证 covar_calc 产生的应用协方差数据库的正确性，本文将 NECP-Atlas 产生的多群协方差数据库与核数据处理程序 NJOY21 在相同条件下产生的协方差数据库进行直接对比，构造相对偏差矩阵，统计各相对偏差矩阵中元素的最大值和矩阵的 F 范数（矩阵中所有元素的平方和的开方值），通过这两个数值的大小来反映多群协方差数据库的偏差程度。

在计算过程中，共振参数的协方差数据通过转化得到中子截面的协方差数据。因此通过直接对比中子截面的多群协方差数据库，可以同时验证 NECP-Atlas 处理共振参数协方差和中子截面协方差数据的功能。表 1 给出了本文计算得到的不同核素、不同类型核数据的相对偏差矩阵的最大值和 F 范数，对平均裂变中子数、中子截面（含共振参数）、平均散射角余弦、裂变谱等不同类型核数据进行了验证。

表 1 不同类型核数据的协方差数值验证结果
Table1 Numerical verification results of the covariance of different nuclides and different nuclear data types

| 核素 Nuclides | 核数据 1 Nuclear data 1 | 核数据 2 Nuclear data 1 | 最大值 Maximum value /% | F 范数 Frobenius norm | 核素 Nuclides | 核数据 1 Nuclear data 1 | 核数据 2 Nuclear data 1 | 最大值 Maximum value /% | F 范数 Frobenius norm |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| U-235 | $\sigma_{elas}$ | $\sigma_{elas}$ | -1.423E-04 | 7.315E-07 | U-235 | $\sigma_{\gamma}$ | $\sigma_{\gamma}$ | -1.226E-01 | 5.150E-05 |
| U-235 | $\bar{\nu}_t$ | $\bar{\nu}_t$ | -6.145E-05 | 5.054E-07 | U-235 | $\bar{\nu}_t$ | $\bar{\nu}_p$ | -6.674E-05 | 5.102E-07 |
| Pu-239 | $\bar{\mu}$ | $\bar{\mu}$ | 2.373E-02 | 2.398E-05 | U-235 | $\chi$ | $\chi$ | -2.683E-04 | 6.779E-05 |
| O-16 | $\bar{\mu}$ | $\bar{\mu}$ | -3.728E-02 | 5.414E-05 | U-238 | $\chi$ | $\chi$ | -1.973E-04 | 7.885E-05 |

从上表可以看出，对于所测试的反应道，NECP-Atlas 与 NJOY21 的相对偏差矩阵中的最大偏差范围为-0.1226%~0.02373%，相对偏差矩阵的 F 范数不超过 $8\times10^{-5}$，证明 NECP-Atlas 产生的协方差数据的正确性。

## 3 协方差数据库在不确定度量化中的验证

为进一步验证多群协方差数据计算的正确性，分别基于 NECP-Atlas 和 NJOY21 产生了 69 群多群协方差数据库，采用 NECP-UNICORN[20]程序基于以上多群数据库库计算了 UAM-LWRs 系列基准题中的 TMI-1 燃料栅元基准题[21]，量化了不同核素各反应道对无限增殖因子 $k_{\text{inf}}$ 造成的相对不确定度，其计算公式见(28)：

$$\frac{\Delta k_{\text{inf}}}{k_{\text{inf}}}\times100\% \tag{28}$$

式中：$\Delta k_{\text{inf}}$——NECP-UNICORN 计算得到的无限增殖因子 $k_{\text{inf}}$ 的不确定度。

表 2 给出了热态满功率工况下的 TMI-1 栅元中不同核素不同反应道对 $k_{\text{inf}}$ 造成的的相对不确定度，对比了基于 NECP-Atlas 与 NJOY21 产生的多群协方差数据库的计算结果的偏差，从表中可以看出 NECP-Atlas 产生的多群协方差数据库，具有与 NJOY21 相当的精度，不确定度的相对偏差全部在 0.1%以下。

表 2 基于多群协方差的 TMI-1 栅元无限增殖因子 $k_{\text{inf}}$ 相对不确定度计算结果
Table2 Calculation results of TMI-1 cell relative uncertainties of infinite multiplication factor based on multi-group covariance

| 核素及反应道 Nuclides and recations | NJOY21 结果/% NJOY21 results/% | NECP-Atlas 结果/% NECP-Atlas results/% | 相对偏差/% realative bias/% | 核素及反应道 Nuclides and recations | NJOY21 结果/% NJOY21 results/% | NECP-Atlas 结果/% NECP-Atlas results/% | 相对偏差/% relative bias/% |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| U-235 $\sigma_{elas}$ | 1.172E-03 | 1.172E-03 | 0.000 | U-238 $\sigma_{elas}$ | 1.410E-01 | 1.410E-01 | -0.001 |
| U-235 $\sigma_{inel}$ | 1.454E-03 | 1.454E-03 | 0.000 | U-238 $\sigma_{inel}$ | 1.253E-01 | 1.253E-01 | 0.000 |
| U-235 $\sigma_{2n}$ | 2.715E-04 | 2.715E-04 | 0.004 | U-238 $\sigma_{2n}$ | 1.198E-02 | 1.199E-02 | 0.084 |
| U-235 $\sigma_{f}$ | 7.638E-02 | 7.638E-02 | 0.000 | U-238 $\sigma_{f}$ | 1.564E-02 | 1.564E-02 | 0.000 |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| U-235 $\sigma_\gamma$ | 1.967E-01 | 1.967E-01 | 0.000 | U-238 $\sigma_\gamma$ | 2.906E-01 | 2.906E-01 | 0.001 |
| U-235 ν | 1.251E-01 | 1.251E-01 | 0.000 | U-238 ν | 7.336E-02 | 7.336E-02 | 0.000 |
| H-1 $\sigma_{elas}$ | 3.278E-02 | 3.278E-02 | 0.000 | O-16 $\sigma_{elas}$ | 1.996E-02 | 1.996E-02 | 0.000 |
| H-1 $\sigma_\gamma$ | 9.495E-02 | 9.495E-02 | 0.000 | O-16 $\sigma_\gamma$ | 1.998E-04 | 1.998E-04 | 0.000 |

为验证 NECP-Atlas 中连续能量协方差数据制作功能的正确性，使用蒙特卡罗程序 NECP-MCX[22, 23]，计算了 ICSBEP 基准题库中的 Godiva 基准题、Jezebel 基准题[24]中主要核素对有效增殖因子 $k_{eff}$ 的灵敏度系数，并基于连续能量协方差数据计算得到相对不确定度结果，与 NECP-UNICORN 基于多群协方差数据计算的结果进行了对比。在基准题 Godiva 基准题及 Jezebel 基准题中，对比核素分别选为 U-235 及 Pu-239，不确定度计算结果如表 3 所示。从表中可以看出，基于连续能量协方差数据的相对不确定度计算结果和多群协方差计算结果最大偏差为 1.45%，但此时绝对偏差仅为 $4\times10^{-5}$ （4 pcm），证明了 NECP-Atlas 中连续能量协方差制作功能的正确性，可以用于蒙特卡罗程序的不确定度量化。

**表 3 基于多群协方差和连续能量协方差的相对不确定度计算结果对比**

Table3 Comparison of relative uncertainty results based on multi-group covariances and continuous-energy covariances

| Godiva 基准题 U-235<br>Godiva Benchmark U-235 | | | | Jezebel 基准题 Pu-239<br>Jezebel Benchmark Pu-239 | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 核素及反应道<br>Nuclides and recations | 多群协方差计算结果<br>multi-group covariance calculation results | 连续能量协方差计算结果<br>continus energy covariance calculation results | 相对偏差/%<br>realative bias/% | 核素及反应道<br>Nuclides and recations | 多群协方差计算结果<br>multi-group covariance calculation results | 连续能量协方差计算结果<br>continus energy covariance calculation results | 相对偏差/%<br>realative bias/% |
| $\sigma_{elas}$ | 2.900E-03 | 2.920E-03 | 0.69 | $\sigma_t$ | 1.550E-02 | 1.544E-02 | -0.39 |
| ν | 3.990E-03 | 3.995E-03 | 0.01 | $\sigma_{inel}$ | 8.700E-03 | 8.670E-03 | -0.34 |
| $\sigma_\gamma$ | 2.750E-03 | 2.790E-03 | 1.45 | $\sigma_f$ | 9.050E-03 | 9.060E-03 | 0.11 |
| $\sigma_f$ | 7.880E-03 | 7.880E-03 | 0.00 | ν | 3.180E-03 | 3.170E-03 | -0.31 |

## 4 结论

本文针对评价核数据库给出的各类型的协方差数据，分别研究了相应的应用协方差数据计算方法，在核数据处理程序 NECP-Atlas 中开发了协方差计算模块 covar_calc，完成了协方差数据计算模块的国产化、自主化，实现了平均裂变中子数、共振参数、中子截面、次级粒子角度分布、裂变谱、中子活化截面等评价协方差数据的处理，产生对应的多群协方差数据库或连续能量协方差数据库。通过与 NJOY21 制作的多群协方差数据库进行比较以及基准题的检验，验证了 NECP-Atlas 制作的多群协方差数据库的正确性，计算精度与 NJOY21 相当；通过将 NECP-Atlas 制作的连续能量协方差数据库计算的数值结果与多群协方差数据库的计算结果对比，证明了连续能量协方差数据库的正确性。后续研究人员开展不确定度量化相关工作时，应根据中子学输运计算程序的特点，制作并使用相应的协方差数据库。基于确定论程序的不确定度量化，应选择与多群数据库版本一致、能群结构一致的多群协方差数据库，基于蒙特卡罗程序进行不确定度量化，可直接采用版本一致的连续能量协方差数据库。

**作者贡献声明** 黄义涵：程序开发、验证计算、结果分析、起草文章；祖铁军：程序开发、理论指导，以及文章整体设计及修改；曹良志：理论指导；吴宏春：理论指导。

## 参考文献

1 葛智刚, 陈永静. 核数据评价与建库研究[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50(5): 19–28.

GE Zhigang, CHEN Yongjing. Research on nuclear data evaluation and development of data library[J]. Scientia Sinica (Physica, Mechanica & Astronomica), 2020, 50(5): 19–28.[知网中文][知网英文]

2 Trkov A, Brown D A. ENDF-6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files [R]. Brookhaven National Lab. (BNL), Upton, NY (United States), 2008.

3 Chadwick M B, Obložinský P, Herman M, et al. ENDF/B-VII.0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology[J]. Nuclear Data Sheets, 2006, 107(12): 2931–3060. DOI: 10.1016/j.nds.2006.11.001.[LinkOut]

4 Chadwick M B, Herman M, Obložinský P, et al. ENDF/B-VII.1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data[J]. Nuclear Data Sheets, 2011, 112(12): 2887–2996. DOI: 10.1016/j.nds.2011.11.002.[LinkOut]

5 Brown D A, Chadwick M B, Capote R, et al. ENDF/B-VIII.0: the 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO-project cross sections, new standards and thermal scattering data[J]. Nuclear Data Sheets, 2018, 148: 1–142. DOI: 10.1016/j.nds.2018.02.001.[LinkOut]

6 Ge Z, Xu R, Wu H, et al. CENDL-3.2: The new version of Chinese general purpose evaluated nuclear data library[J]. EPJ Web of Conferences, 2020, 239: 09001. DOI: 10.1051/epjconf/202023909001

7 Chiba G. ERRORJ: A code to process neutron-nuclide reaction cross section covariance, version 2.3 [R]. Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Ibaraki (Japan); Japan, 2007.

8 Macfarlane R, Muir D W, Boicourt R M, *et al.* The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016[M]. United States, 2017.

9 刘萍, 吴小飞, 李松阳, 等. 群常数制作软件 Ruler 研发[J]. 原子能科学技术, 2018, 52(7): 1153–1159. DOI: 10.7538/yzk.2018.52.07.1153.

LIU Ping, WU Xiaofei, LI Songyang, et al. Development of multi-group constant processing software ruler[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2018, 52(7): 1153–1159. DOI: 10.7538/yzk.2018.52.07.1153.[知网中文][知网英文]

10 余健开. 堆用重要核数据评价处理及应用的关键方法与软件研发[D]. 北京: 清华大学, 2015.

YU Jiankai. Key Methods and Software Development of Evaluation, Processing and Application of Important Nuclear Data for Reactor[D].Beijing: Tsinghua University, 2015.[知网]

11 丘意书,余健开,梁金刚, 等.基于 RMC 程序的 $k_{eff}$ 对核数据的敏感性分析[J].原子能科学技术,2015,49(10):1821-1827. DOI: 10.7538/yzk.2015.49.10.1821.

QIU Yishu, YU Jiankai, LIANG Jingang, et al. $k_{eff}$ Sensitivity analysisi to nuclear data with RMC code[J]. Atomic Energy Science and Technology ,2015, 49(10): 1821-1827.

12 黄金龙,曹良志,贺清明,等.连续能量核数据敏感性分析及其在 AP1000 中的应用[J].原子能科学技术,2022,56(01):53-60. DOI: 10.7538/yzk.2021.youxian.0491

HUANG JinLong, CAO Liangzhi, HE Qingming, et al. Sensitivity Analysis of continuous-energy nuclear data and its application in AP1000[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2022, 56(01): 53-60.

13 Aufiero M, Bidaud A, Hursin M, et al. A collision history-based approach to sensitivity/perturbation calculations in the continuous energy Monte Carlo code SERPENT[J]. Annals of Nuclear Energy, 2015, 85:245-258. DOI: 10.1016/j.anucene.2015.05.008.[LinkOut]

14 Zu T J, Xu J L, Tang Y Q, et al. NECP-Atlas: a new nuclear data processing code[J]. Annals of Nuclear Energy, 2019, 123: 153–161. DOI: 10.1016/j.anucene.2018.09.016.[LinkOut]

15 祖铁军, 徐嘉隆, 吴宏春, 等. 核数据处理程序 NECP-Atlas 的开发与验证[J]. 原子能科学技术, 2018, 52(7): 1160–1165. DOI: 10.7538/yzk.2018.52.07.1160.

ZU Tiejun, XU Jialong, WU Hongchun, et al. Development and validation of nuclear data processing code NECP-atlas[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2018, 52(7): 1160–1165. DOI: 10.7538/yzk.2018.52.07.1160.[知网中文][知网英文]

16 徐嘉隆, 祖铁军, 曹良志, 等. NECP-Atlas 中多群常数处理模块的开发与验证[J]. 核动力工程, 2019, 40(1): 12–17. DOI: 10.13832/j.jnpe.2019.01.0012.

XU Jialong, ZU Tiejun, CAO Liangzhi, et al. Development and verification of multi-group constants processing module in NECP-atlas[J]. Nuclear Power Engineering, 2019, 40(1): 12–17. DOI: 10.13832/j.jnpe.2019.01.0012.[知网中文][知网英文]

17 高峰, 刘绪庆, 姜红燕. 概率论与数理统计[M]. 2 版. 南京: 南京大学出版社, 2019.

GAO Feng, LIU Xuqing, JIANG Hongyan. Probability and Mathematical Statistics[M]. 2nd ed. Nanjing: Nanjing University Press, 2019.[LinkOut]

18 李乃成, 梅立泉. 数值分析[M]. 北京: 科学出版社, 2011.

LI Naicheng, MEI Liquan. Numerical analysis[M]. Beijing: Science Press, 2011.[LinkOut]

19 徐嘉隆. 堆用核数据处理新方法研究及自主化核数据处理程序 NECP-Atlas 的开发[D]. 西安: 西安交通大学, 2019.

XU Jialong. Research on New Methods of Nuclear-data Processing for Reactor Applications and Development of Independent Nuclear-data Processing Code NECP-Atlas[D]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2019

20 Zu T J, Wan C H, Cao L Z, et al. Total uncertainty analysis for PWR assembly based on the statistical sampling method[J]. Nuclear Science and Engineering, 2016, 183(3): 371﹣386. DOI: 10.13182/nse15-96.[LinkOut].

21 Ivanov K, Avramova M, Kodeli I A*, et al.* Benchmark for uncertainty analysis in modeling (UAM) for design, operation and safety analysis of LWRs[R]. OECD, 2007.

22 Huang J L, Cao L Z, He Q M, et al. Improvement of the CLUTCH method for sensitivity analysis of *k*-eigenvalue to continuous-energy nuclear data in NECP-MCX[J]. Progress in Nuclear Energy, 2023, 160: 104666. DOI: 10.1016/j.pnucene.2023.104666.[LinkOut]

23 He Q M, Zheng Q, Li J, et al. NECP-MCX: a hybrid Monte-Carlo-Deterministic particle-transport code for the simulation of deep-penetration problems[J]. Annals of Nuclear Energy, 2021, 151: 107978. DOI: 10.1016/j.anucene.2020.107978.[LinkOut]

24 Briggs J B, Scott L, Nouri A. The International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project [J]. Nuclear Science and Engineering, 2003, 145, 1 1-10.